

In the $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ ($x = 0, 0.1$) lattice, the lithium ions migrate along channels oriented in the [010] direction [5]. Doping LiNiPO_4 by cobalt ions increases noticeably the amplitude of the thermal vibrations of Li^+ ions in the [010] direction. Besides, the interatomic distances increase, indicating a development of the Li-ion mobility.

In the unit cell of $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{PO}_4$ ($x = 0, 0.1$) 20 types of elementary voids were found, of which only two types ZA15 and ZA17 satisfy the size factor, create the infinite migration channel and build a migration map.

1. Pieczonka N.P.W., Liu Z. et al., J. Power Sources, 230, 122 (2013).
2. Nishimura S.-I., Kobayashi G. et al., Nat. Mater., 7, 707 (2008).
3. Anurova N.A., Blatov V.A., Acta Cryst., 65, 426 (2009).
4. Blatov V.A., IUCr CompComm Newslett., 7, 4 (2006).
5. Urusova N.V., Semkin M.A. et al., J. Alloys Compd., 781, 571 (2019).

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ В ПОСТОЯННЫХ МАГНИТАХ СИСТЕМЫ Sm-Co

Уржумцев А.Н.^{1*}, Москалев В.Н.², Волегов А.С.¹

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ ООО «ПОЗ-Прогресс», г. Верхняя Пышма, Россия

*E-mail: andrei.urzhumtsev@urfu.ru

PROCESSES OF MAGNETIZATION REVERSAL IN PERMANENT MAGNETS OF THE Sm-Co-TYPE

Urzhumtsev A.N.^{1*}, Moskalev V.N.², Volegov A.S.¹

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ POZ-Progress Company, Verkhnyaya Pyshma, Russian Federation

Annotation. Permanent magnets bases of $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ -type are widely used in the energy and aerospace industries but some features of hysteresis properties could not be explained in terms of existing models up to now. The purpose of this work is to create a model of the magnetization reversal processes of the isotropic permanent magnets of the $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ system using advanced magnetometry techniques.

Редкоземельные постоянные магниты типа $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ нашли свое широкое применение еще с начала 1970-х годов. Они являются незаменимыми для электродвигателей и генераторов, а также магнитных муфт, температура эксплуатации которых превышает 150°C , либо требуется высокая температурная стабильность остаточной индукции в диапазоне температур от -50°C до $+100^\circ\text{C}$. Последнее свойство особенно актуально для навигационных систем авиации, кораблей, ракет, космических станций, спутников и др. Несомненным преимуществом

является высокая коррозионная стойкость и временная стабильность данного класса магнитов.

Несмотря на тот факт, что магниты типа $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ исследуются уже более сорока лет, и в литературе хорошо описаны механизмы формирования их фазовой структуры, а также процессы перемагничивания и механизмы формирования коэрцитивной силы, которые основываются на задержке доменных стенок, остаются не до конца понятные механизмы пиннинга доменной границы на межфазных выделениях фазы типа SmCo_5 . Цель настоящей работы заключается в создании модели процессов перемагничивания изотропных постоянных магнитов системы $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ с использованием передовых методик магнитометрии.

Для исследования выбраны изотропные спеченные магниты КС-25 из сплава Sm-Zr-Fe-Co-Cu . Измерение петель гистерезиса и магнитной восприимчивости проводилось на вибрационном магнитометре КВАНС – 1 и магнитоизмерительном комплексе MPMS XL – 7 (Quantum Design).

На основе зависимостей $\chi_{\parallel}(\text{H})$ и $\chi_{\perp}(\text{H})$ установлено, что существующие модели не в состоянии корректно описать механизмы магнитного гистерезиса в данных соединениях. По всей видимости существенное влияние оказывает обменное взаимодействие между ячейками фазы $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ и расположенными между ними выделениями фазы SmCo_5 .

AB-INITIO CALCULATIONS OF CO₂ ADSORPTION ON NONPOLAR (100) ZnO SURFACE

Usseinov A.^{1*}, Akilbekov A.¹, Dauletbekova A.¹, Geniyatova Sh.¹,
Soltanbek N.¹, Nekrasov K.², Seitov D.²

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

*E-mail: useinov_85@mail.ru

Annotation. In this paper, the *ab-initio* calculations of the CO₂ molecule adsorption on the nonpolar ZnO surface were carried out in order to find the equilibrium configuration of the adsorbed molecule, as well as we studied the effect of impurity concentration and the presence of native point defects onto binding energy of molecule. Also, the potential formation of a new molecular complex is considered. All results were compared with known experimental data.

For the development of solid-state systems for detecting bio- and gas mixtures, a deep understanding of the interaction between impurities with the active surface of the sensor at the atomic level plays a high role. In our work, a computer simulation of the carbon dioxide adsorption on nonpolar (100) ZnO surface with various configurations and location on the surface was carried out. All calculation details were taken from our previous work by calculation of hydrogen adsorption on ZnO surface and can be